Consiglio Nazionale delle Ricerche

Attraverso tecniche di spettroscopia di luminescenza, un team di ricerca dell'Istituto nanoscienze del Cnr ha mostrato che è possibile distinguere dettagli di dimensione atomica nella struttura dei materiali "stratificati", cioè composti da strati atomici molto compatti, difficili da differenziare. Lo studio, pubblicato su Physical Review Letters, ha potenziali sviluppi applicativi, in particolare nell'ingegnerizzazione di nuovi materiali

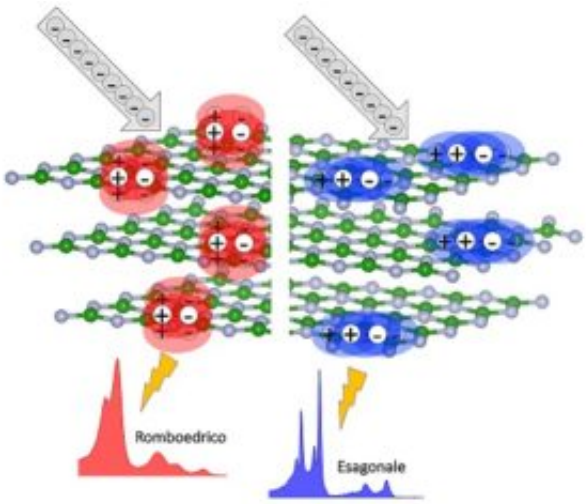

Fig. 1

Roma, 19 dicembre 2023 - Ricercatori dell'Istituto nanoscienze del Consiglio nazionale delle ricerche di Modena (Cnr-Nano), in collaborazione con colleghi della Università Paris-Saclay, hanno dimostrato un metodo per rivelare differenze, altrimenti indistinguibili, nella struttura cristallina di materiali semiconduttori "stratificati", cioè composti da strati atomici molto compatti, impilati.

Grazie all'analisi dettagliata della luce emessa del materiale, nota come spettroscopia di luminescenza, il team è riuscito, infatti, a cogliere le differenze della struttura cristallina di due materiali semiconduttori stratificati che presentano differenze praticamente indistinguibili, il nitruro di boro esagonale e quello romboedrico. Lo studio è pubblicato su Physical Review Letters.

“Pur essendo costituite dagli stessi elementi, boro e azoto, le due forme del materiale preso in esame si differenziano solo per come gli strati atomici sono sovrapposti fra loro - spiega Daniele Varsano, ricercatore del Cnr-Nano tra gli autori dello studio - In base a queste differenze, cambiano le proprietà elettroniche e strutturali, nonché le possibili applicazioni: dall’uso nei dispositivi opto-elettronici, quali i LED, all’impiego in materiali ceramici”.

I ricercatori hanno dimostrato che la luce emessa da questi materiali, quando vengono eccitati da una corrente elettrica, è un potente strumento per distinguere chiaramente e senza ambiguità le due forme simili, in modo da separare la versione con le proprietà desiderate dall’altra.

Per giungere al risultato è stata essenziale la combinazione di esperimento e teoria. Fisici sperimentali dell’Università Paris-Saclay hanno misurato e analizzato con estrema precisione gli spettri della luce emessa dalle due versioni del nitruro di boro. Le differenze osservate sono state spiegate grazie allo studio teorico condotto dai ricercatori di Cnr-Nano, Fulvio Paleari, Daniele Varsano, Elisa Molinari e Matteo Zanfrognini.

“Le simulazioni mostrano che la luce emessa è influenzata dalle simmetrie del reticolo cristallino, diverse nella forma esagonale e romboedrica. In particolare, le differenze negli spettri derivano dal diverso modo con cui i nuclei atomici, vibrando, colpiscono gli elettroni del materiale inducendoli a emettere luce”, spiega Fulvio Paleari.

“Lo studio dimostra che, se misurato con precisione, lo spettro di emissione è molto più sensibile a minime differenze strutturali rispetto ad altre tecniche sperimentali comunemente impiegate - prosegue Paleari - Questo può permettere, quando si ingegnerizzano nuovi materiali, di distinguere facilmente le strutture cristalline garantendo maggiore controllo sulle proprietà optoelettroniche finali dei dispositivi. Dal punto di vista teorico, lo studio evidenzia il ruolo determinante dell’interazione fra nuclei atomici ed elettroni eccitati nei materiali stratificati”.

“L’emissione della luce da parte di un materiale è un processo di natura quantistica che implica una serie complessa di interazioni tra i fotoni, gli elettroni, i nuclei degli atomi che compongono la struttura cristallina. Il gruppo teorico di Cnr-Nano è in grado di condurre simulazioni che includono gli effetti di tutte queste interazioni grazie a un avanzato software di meccanica quantistica sviluppato nell’ambito del Centro di Eccellenza Europeo MaX per lo studio teorico dei materiali, e del centro Nazionale di Ricerca in HPC, Big Data and Quantum Computing ICSC e facendo uso di supercalcolatori ad alte prestazioni grazie alla collaborazione con il Cineca di Bologna”, conclude Varsano.

(Fig. 1 - Nitruro di boro esagonale (destra) e romboedrico (sinistra). Le due forme sono quasi indistinguibili guardando il reticolo cristallino. Quando il materiale viene colpito da un fascio di elettroni si formano delle eccitazioni elettroniche, che a loro volta interagiscono con le vibrazioni del reticolo cristallino emettendo luce. La luce emessa dai due materiali ha spettro differente (rosso / blu) a causa delle vibrazioni nella direzione verticale che giocano un ruolo solo nella forma romboedrica)